流体中のクラスターの成長における慣性の効果(秩序形成の初期過程におけるスケーリング則と非平衡熱力学,研究会報告)

古川, 浩

流体中のクラスターの成長における慣性の効果

山口大学教育学部　古川 浩

保存するオーダーパラメーターを持った系や非保存系でも条件が満たされるなら、相分離においてスケーリング則が存在すると考えられている。すなわち波数 k と時間 t に依存する相関関数のフーリエ成分 $G_k(t)$ に対して

$$G_k(t) = [L(t)]^{\gamma}\,\tilde{G}(kL(t)) \tag{1}$$

とおける。ここで L は長さのスケールである。(1)の例として構造関数 $S_k(t) \equiv \langle |n_k(t)|^2 \rangle$ に対して

$$S_k(t) = n^2 L^d\,\tilde{S}(Lk) \tag{2}$$

とおける。ここで d は空間次元，n はオーダーパラメーター。$L(t)$ はこのスケーリングの下で

$$L(t) \propto t^a, \tag{3}$$

となる。ここで exponent a は

$$a = (d+\theta+\zeta-h)^{-1} \tag{4}$$

となる。ここで θ は保存系で 2，非保存系で 0，ζ は液体で -2，固体で $\zeta = 1-\theta/2$。h は表面張力が effective な場合 $d-1$，そうでない場合 0 となる。ζ, h はそれぞれモビリティ M_k，エネルギー H_k のスケーリング指数で

$$M_k(t) = L^{-\zeta}\,\tilde{M}(Lk), \quad H_k = \langle (\delta F/\delta n_{-k})\, n_{-k} \rangle = L^h\,\tilde{H}(Lk), \tag{5}$$

である。ここで F は自由エネルギー　$\mu = \delta F/\delta n_{-k}$ は化学ポテンシャルである。(4)は系が散逸的である場合にのみ有効であり、それ故液体では臨界点のごく近傍でのみ有効である。ここでは上のスケーリングを散逸的でない液体へ拡張する[1]。散逸系の相分離は通常 G-L type の方程式

$$\frac{d}{dt} n(\vec{r},t) = M\nabla^2\mu(\vec{r},t) + f(\vec{r},t) \tag{6}$$

によって記述される。液体の慣性の効果は Navier–Stokes 方程式を出発点として

$$\frac{d}{dt} n(\vec{r},t) = M\left[\nabla^2\mu(\vec{r},t) + m\vec{\nabla}\cdot\frac{D\vec{u}(\vec{r},t)}{Dt}\right] + f(\vec{r},t) \tag{7}$$

と書くことが出来る。ここで $\vec{u}$ はオーダーパラメーターの流速で D は流体に乗った座標系での微分を表わす。(7)式は次のようにして得られる。温度T=一定の条件下での Navier-Stokes 方程式は

$$\frac{D\vec{u}(\vec{r},t)}{Dt} = -\frac{1}{m}\vec{\nabla}\mu(\vec{r},t) + \nu\nabla^2\vec{u}(\vec{r},t) + \vec{f}^{(u)}(\vec{r},t),$$

と書ける。ここで $m=\rho_0/n$, ρ_0 は液体の質量密度, $\vec{f}^{(u)}$ はランダム力。この式の右辺第2項で $\nabla^2 \to -/L^2c_1$ とおいて、$\vec{u}$ について解き、オーダーパラメーターの current $\vec{j}$ として次を得る。

$$\vec{j} = n\vec{u} = M\left[-\vec{\nabla}\mu(\vec{r},t) - m\frac{D\vec{u}(\vec{r},t)}{Dt}\right] + m\vec{f}^{(u)}(\vec{r},t)$$

ここで $M = c_1 n L^2/m\nu$ はモビリティ。この $\vec{j}$ を連続の式：$\frac{d}{dt}n = -\nabla\vec{j}$ に代入して(7)式を得る。(7)式から相関関数②及び④の間の関係式

$$\frac{d}{dt}S_k(t) + 2I_k(t) = 2Mk^2[k_BT - H_k(t)] \tag{8}$$

が得られる。ここで

$$I_k(t) = mM\,\mathrm{Re}\left\langle\left[i\vec{k}\cdot\frac{D\vec{u}_k(t)}{Dt}\right]n_{-k}(t)\right\rangle \tag{9}$$

Lの時間発展を求める為に(8)の各項を時間tとLによって次元解析する。そのとき $\vec{k}\cdot\frac{D\vec{u}_k}{Dt} \propto \frac{L^0}{t^2}$ であることを考慮して $I_k(t) \propto a_2 c_2 m M n L^d t^{-2}$ とスケール出来る。それ故(8)は

$$c_2 n^2\frac{L^d}{t} + 2a_2c_2 mMnL^dt^{-2} = 2ML^2(k_BT - H_L). \tag{10}$$

ここで右辺は Navier-Stokes eq. の圧力項, 左辺第一項は散逸項に, 第二項は慣性項に対応する。それ故相分離は圧力項と散逸項あるいは慣性項間のバランスにより生ずる。左辺第一項, 第二項をそれぞれ, D, I とおき, 右辺を $P^{(e)}$ $P^{(s)}$ に分離する。ここで (e) はクラスターの配置のエントロピー, (s) は表面張力を表わす。(10)式は

$$D + I = P^{(e)} + P^{(s)} \tag{11}$$

と書ける。それ故 $R \equiv I/D$ （レーノルズ数), 及び $Q \equiv P^{(e)}/P^{(s)}$ と1との大小によって4つの場合に分類され, その各々に特有な成長速度の動的指数 a が存在する。

それらは、それぞれ

$(D-P^{(e)})$のバランスで　$a=1/d$，$(D-P^{(s)})$のバランスで 1

$(I-P^{(e)})$のバランスで　$2/(d+2)$，$(I-P^{(s)})$のバランスで $2/3$

となる。液体の場合表面張力が有効なのはクラスターがpercolateする場合と考えられる[2]. そのはん囲は少数相のvolume fraction v が $2/z$（zは球の最密充てんにおける最近接個数; $z=6$ (for $d=2$), $z=12$ (for $d=3$)）[3]. 又上の動的指数の有効性は温度によっても異る。それは(10)の係数が温度によっているからである。スケールされた変数 $\tilde{L}\equiv L/\xi$, $\tilde{t}\equiv(D_T/\xi^2)t$, ここで ξ, D_T はそれぞれ相関きょり, 拡散係数, によってその有効領域を図示すると下図のようになる。しかしながらこれらの領域は明確な分離が可能ではないかもしれず, 指数も連続的に変化する可能性もあり[3], このことは実験的にもみとめられる[4]. 慣性の効果が大きい場合は系はturbulentになると考えられ, turbulenceとの関連をさらに研究する必要があると思われる。又ここでのaの導出は本質的に乱流のK41と同等な手続によっている。

参考文献

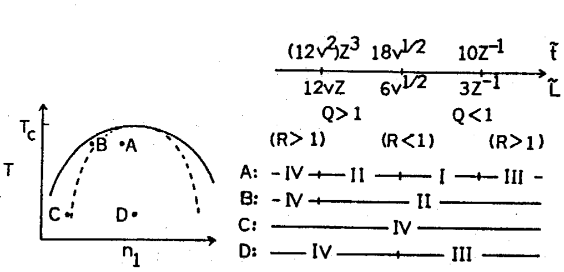
[1] H. Furukawa, to be published (Phys. Rev. A).

[2] E.D. Siggia, Phys. Rev. A20, 595 (1979).

[3] H. Furukawa, Prog. Theor. Phys. 71, 438 (1984)

[4] Y. Ohyama, S. Kinoshita, M. Takahashi, and T. Nose (Preprint).

(a)　　(b)



Growth laws; I: $\tilde{L}=0.3\tilde{t}$, II: $\tilde{L}=(12v)^{1/3}\tilde{t}^{1/3}$, III: $\tilde{L}=(0.3/Z)^{1/3}\tilde{t}^{2/3}$, IV: $\tilde{L}=(12v/Z)^{1/4}\tilde{t}^{2/5}$.

$Z=C(r_0/\xi)^{d-2}$